Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001982

Державний реєстраційний номер: 0121U110142

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вплив структурних факторів на швидкість і регіоселективність ре акції розкриття оксиранового циклу методами експериментальної та теоретичної хімії

Початок етапу: 03.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380432508930, 380432508778

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, буд. 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380432508930

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7706 - безплатно (договір про науково-технічне співробітництво, тощо)

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Сумісний вплив температури та структури на каталітичний ацидоліз епіхлоргідрину

Назва роботи англійською:

Joint effect of temperature and structure on catalytic acidolysis of epichlorohydrin

Реферат українською:

Методами хімічної кінетики та квантовохімічного моделювання досліджено кінетику, регіоселективність та механізм каталізу розкриття циклу 2-(хлорметил)оксирану бензойною кислотою в присутності органічних основ. Модельну реакцію проводили з використанням 2-(хлорметил)оксирану як субстрату і розчинника в температурних межах 323-343 К. Константи швидкості та параметри активації розкриття циклу визначали для загальної реакції та для паралельних реакцій утворення ізомерних «нормальних» та «аномальних» продуктів. Методами квантової хімії встановлено, що лімітуючою стадією є атака аніону бензоату на атоми карбону циклу 2-(хлорметил)оксирану. Встановлено, що каталізатори, які є слабкими нуклеофільними основами, збільшують регіоселективність реакції за рахунок збільшення внеску механізму SN2. Досліджено вплив наповнювача – наночастинок оксиду цирконію (IV) на термічну стабільність композитів на основі епоксидної смоли ЕД-20, ізометилтетрагідрофталевого ангідриду, комплексного каталізатора та пластифікатора. Стійкість отриманих полімерів та композитів до термоокислювальної деструкції оцінено методом дериватографії. Оцінка ефективності впливу ZrO2 на тверднення проводилася за даними диференціальної скануючої калориметрії (ДСК) методом Кісінджера. Встановлено оптимальний вміст ZrO2 у складі.

Реферат англійською:

Using methods of chemical kinetics and quantum chemical modeling, the kinetics, regioselectivity and mechanism of catalysis the reaction of the ring opening of 2-(chloromethyl)oxirane by benzoic acid in the presence of organic bases were investigated. The model reaction was carried out using 2-(chloromethyl)oxirane as both reagent and solvent at temperatures of 303-333 K. Rate constants and activation parameters of the ring opening were determined for the overall reaction and for the formation of the isomeric “normal” and “abnormal” products. It was established by quantum chemistry methods that the rate limiting stage is the attack of the benzoate anion on the carbon atoms of the ring of 2-(chloromethyl)oxirane. It has been found that catalysts that are weak nucleophilic bases increase the reaction regiospecificity by increasing the contribution of the SN2 pathway. The effect of the filler – the nanoparticles of zirconium (IV) oxide on the thermal stability of composites based on epoxy resin ED-20, isomethyltetrahydrophthalic anhydride, complex catalyst, and plasticizer were studied. The resistance of the obtained polymers and composites to thermal oxidative degradation was evaluated by derivatography. Evaluation of the effectiveness of the influence of ZrO2 on the curing was carried out according to the data of differential scanning calorimetry (DSC) by the Kissinger method. It was established the optimal content of ZrO2 in the composition.

Індекс УДК: 544.1;544.41, 547:544.18; 547:544.16; 547:544.12 , 547:544-42/.43 , 547-311:[(547.56 +547.29):547-304.2/544.476 +541.127:544.323.2]

Коди тематичних рубрик: 31.15.27.05, 31.21.15 , 31.21.18

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Швед Олена Миколаївна

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

IX. Бібліографічний опис

Yuliia Bespalko, Marina Sinel'nikova, Elena Shved, Evgeniia Bakhalova Experimental and computational studies of the mechanism of base-catalyzed ring-opening of 2-(chloromethyl)oxirane by benzoic acid. International Journal of Chemical Kinetics., 2021, Vol. 53. No 3, pp. 356–368 DOI:10.1002/kin.21448

S.G. Bakhtin, E.N. Shved, M.A Sinelnikova,. Y.N. Bespalko, Nucleophilic Opening of the Oxirane Ring with Tetraalkylammonium Salt Anions in the Presence of Proton Donors Russian Journal of Organic Chemistry, 2021, Vol. 57. No 4. pp. 524–531

Регіоселективний синтез мономерів епоксидних смол за реакцією розкриття циклу епіхлоргідрину / К. С. Ютілова, О. М. Швед, Н. С. Марценюк, Г. М. Розанцев // Тези доповідей Всеукраїнської конференції наукових дослідників, Львів, 19-25 вересня 2021 року. Львів, 2021. С. 127.

Синтез металокомплексу на основі саленового ліганду і його застосування для каталізу реакції ацетолізу епіхлоргідрину / Париш М. О., Ютілова К. С., Швед О. М. // Тези доп. XIII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські читання-2021». Харків, 2021. С. 80-81.

Каталіз ацетолізу епіхлоргідрину третинними амінами із варійованим стеричним фактором в присутності тетрагідрофурану / Ткач А. Р., Ютілова К. С., Швед О. М., Розанцев Г. М. // Тези доп. XIII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів «Хімічні Каразінські читання-2021». Харків, 2021. С. 88-89.

Ефект температури і структури реагента на ацидоліз епіхлоргідрину при каталізі тетра-н-бутиламоній хлоридом / Макоцька О. Ю., Ютілова К. С., Швед О. М. // Матеріали V Всеукраїнської наукової конференції «Актуальні задачі хімії: дослідження і перспективи», 15 квітня 2021 р., м. Житомир. Житомир, 2021. С. 279

Створення електронного навчального курсу «Термодинамічні та кінетичні аспекти перебігу реакцій. вплив температури» на платформі MOODLE / Житник О. П., Ютілова К. С., Швед О. М., Розанцев Г. М. // Матеріали V Всеукраїнської наукової конференції «Актуальні задачі хімії: дослідження і перспективи», 15 квітня 2021 р., м. Житомир. Житомир, 2021. С. 336.

Сумісний вплив температури і полярності розчинника на реакційну систему «епіхлоргідрин – пропіонова кислота – тетра-н-бутиламоній йодид» / Кравчук А. В., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня 2021 р., м. Вінниця. Вінниця, 2021. С. 81.

Каталіз реакції ацетолізу 2-(хлорметил)оксирану солями тетраалкіламонію / Марценюк Н. С., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня 2021 р., м. Вінниця. Вінниця, 2021. С. 83.

Синтез комплексних сполук на основі саленових лігандів як перспективних каталізаторів реакції нуклеофільного розкриття оксиранового циклу / Соколовський Д. А., Ютілова К. С., Швед О. М. // Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня 2021 р., м. Вінниця. Вінниця, 2021. С. 87

Спектрофотометричний моніторинг стану триоктиламіну в реакції епіхлоргідрину з оцтовою кислотою / Червонченко І. Д., Ютілова К. С., Швед О. М. / Хімічні проблеми сьогодення: збірник тез доповідей IV Міжнародної (XIV Української) наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених, 23–25 березня

2021 р., м. Вінниця. Вінниця, 2021. С. 90.

Бахалова Є.А., Швед О.М., Марчук Л. С., Опанасюк Л.Ф. Вплив полярності розчинника на реакційну здатність епіхлоргідрину в реакції з бензойними кислотами. Секція "Всеукраїнський симпозіум з органічної та медичної хімії, присвячений 80-річчю проф. В.Д.Орлова": зб. тез доп. всекураїнської конференції наукових дослідників. м. Львів, вересень 19-25, 2021. Львів, 2021. С.54.

Євгенія Бахалова, Олександр Казаков, Юлія Вакулюк, Олена Швед Вплив природи каталізатора та полярності розчинника на швидкість ацидолізу хлорметилоксирану бензойною кислотою. Львівські хімічні читання – 2021: зб. тез доп. XVII наукової конференції, м. Львів, 31 травня - 2 червня, 2021, Львів, 2021. С. О20

Гембарук В. В., Бахалова Є. А., Швед О. М., Янова К. В Вплив тетраетиламоній йодиду на реакцію бензойної кислоти з епіхлоргідрином в тетрагідрофурані. Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2021): зб. тез доп. IV Міжнар. (XIV Українській) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених, м. Вінниця, 23-25 березня 2021 р. Вінниця, 2021. С. 76.

Марчук Л. С., Міщенко А. О., Бахалова Є. А., Швед О. М.В Ацидоліз хлорметилоксирану 3-метилбензойною кислотою в присутності тетрабутиламоній йодиду. Хімічні проблеми сьогодення (ХПС-2021): зб. тез доп. IV Міжнар. (XIV Українській) наук. конф. студентів, аспірантів і молодих учених, м. Вінниця, 23-25 березня 2021 р. Вінниця, 2021. С. 84.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Гринюк Роман Федорович
д.ю.н., 12.00.01

Перелік осіб-виконавців

Бахалова Євгенія Анатоліївна

Беспалько Юлія Миколаївна
(к. х. н., 02.00.03)

Шпанько Ігор Васильович
(д. х. н., 02.00.03)

Ютілова Ксенія Сергіївна
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

РАДІО Сергій Вікторович

Телефон

+38 (095) 397-43-17

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

